2К

УДК 519.85

А.И. Косолап
Днепропетровский национальный университет имени Олеся Гончара,
г. Днепропетровск, Украина
anivkos@ua.fm

Квадратичные оптимизационные задачи компьютерной геометрии

Работа посвящена постановке и решению класса квадратичных оптимизационных задач компьютерной геометрии: поиск эллипсоида минимального объема, содержащего множество точек евклидового пространства, поиск минимального расстояния между эллипсоидами, построение гиперплоскости, разделяющей два эллипсоида. Предложены эффективные алгоритмы для решения этого класса задач.

Введение

Компьютерная, или вычислительная, геометрия – это новое направление исследований, предметом которой является анализ и построение эффективных алгоритмов решения геометрических задач [1]. Она рассматривает такие актуальные задачи, как: триангуляцию, построение выпуклых оболочек, определение принадлежности одного объекта другому, поиск их пересечения, разделение множеств, аппроксимацию и т.п. Компьютерная геометрия используется в распознавании образов, инженерном проектировании, медицине, компьютерной графике, робототехнике, компьютерных играх и т.д. Большинство рассматриваемых задач в этих областях являются оптимизационными, для решения которых разработано большое число методов. Однако решение таких задач в режиме реального времени требует разработки новых и эффективных алгоритмов.

В последние годы внимание исследователей в этой области привлекают такие объекты, как эллипсоиды. Эллипсоиды имеют небольшое количество геометрических параметров и эффективны для приближения широкого класса выпуклых объектов при моделировании физических систем. Обнаружение столкновения или наложения двух эллипсоидов является, таким образом, важной проблемой с приложениями в компьютерной графике, компьютерной мультипликации, виртуальном мире, робототехнике, CAD/CAM, вычислительной физике. Однако использование эллипсоидов ограничивалось недостатком эффективных методов для обнаружения их разделения или наложения. Рассмотрение эллипсоидов в n-мерном евклидовом пространстве является стимулирующим фактором для разработки эффективных алгоритмов квадратичной оптимизации.

Постановка задач и анализ последних результатов

Любой геометрический объект можно представить множеством точек $\{x^i\}$ в n-мерном евклидовом пространстве. Эти точки можно описать эллипсоидом минимального объема. Уравнение эллипсоида имеет вид

$$E(x^0) = \{x \mid (x - x^0)^T Q(x - x^0) \le 1\},$$

где точка x^0 – центр эллипсоида, а Q – положительно определенная матрица. Известно, что эллипсоид минимального объема, содержащий заданное множество точек, единственный. Объем эллипсоида равен

$$Vol(E) = \frac{\omega}{\sqrt{\det(Q)}} = \omega \det(Q^{-1})^{1/2},$$

где ω – объем единичного шара. Таким образом, задача построения эллипсоида, содержащего заданное множество точек $\{x^i\}$, сводится к решению следующей оптимизационной задачи:

$$\min\{\det(Q^{-1}) \mid (x^i - x^0)^T Q(x^i - x^0) \leq 1, i = 1,...,m, Q \succ 0\}, \quad (1)$$

где необходимо определить положительно определенную матрицу Q и вектор x^0. Учитывая то, что функция $\det(Q^{-1})$ является выпуклой, а множество всех положительно определенных матриц образует выпуклый конус, задача (1) является задачей выпуклой оптимизации. Однако условие положительной определенности матрицы не может быть записано в явном виде, что создает трудности в решении задачи (1). Заменим целевую функцию задачи (1) на эквивалентную $\log(\det(Q^{-1}))$. Градиент этой функции равен Q. Это позволяет использовать для решения задачи (1) метод Франка-Вулфа, в котором на каждой итерации решается линейная задача полуопределенной оптимизации

$$\min\{Q_k \times Q \mid (x^i - x^0)^T Q(x^i - x^0) \leq 1, i = 1,...,m, Q \succ 0\}.$$

В настоящее время разработаны прямо-двойственные методы внутренней точки для решения линейных задач полуопределенной оптимизации [2]. Ниже рассматриваются более простые алгоритмы решения задачи (1).

Если геометрический объект задан в виде многогранника $\{x \mid Ax \leq 0, x \geq 0\}$, то задача построения эллипсоида минимального объема, содержащего многогранник, значительно усложняется, так как становится NP-сложной [3].

Для поиска минимального расстояния между двумя эллипсоидами разработан алгоритм [4], в котором на каждой итерации строятся вписанные в эллипсоиды шары максимального радиуса, касающиеся граничной точки эллипсоида. Новое приближение искомого отрезка находят на прямой, соединяющей центры шаров. Другие алгоритмы на каждой итерации решают вспомогательную квадратичную задачу поиска минимального расстояния от точки x^* до границы эллипсоида

$$\min\{\| x - x^* \|^2 \mid (x - x^0)^T Q(x - x^0) \leq 1\}. \quad (2)$$

В работе предлагается эффективный алгоритм для решения задачи (2).

Проблема классификации объектов – одна из наиболее важных в области искусственного интеллекта. Разработано множество алгоритмов для построения гиперплоскостей, разделяющих различные выпуклые объекты [5], [6]. Разделяющую гиперплоскость легко построить, если найдено минимальное расстояние (отрезок) между эллипсоидами. Она будет перпендикулярной минимальному отрезку и проходить через его середину.

Алгоритмы решения задач компьютерной геометрии

Рассмотрим задачу построения эллипсоида минимального объема, содержащего заданное множество точек. Очевидно, что точки, принадлежащие внутренности их

выпуклой оболочки, можно исключить при построении эллипсоида. Для исключения таких точек решим последовательность задач линейного программирования

$$\min\{ \sum_{j\in I(k)}\lambda_j \mid \sum_{j\in I(k)}x^j\lambda_j = x^k,\ \sum_{j\in I(k)}\lambda_j = 1, \lambda\geq 0\},$$

для $k = 1,...,I(k)$, где $I(k)$ – множество индексов оставшихся точек. Если $0 < \max\{\lambda_j\} < 1$, то точку x^k можно представить линейной комбинацией других точек, тогда такие точки исключаем из дальнейшего рассмотрения (обновляем множество индексов $I(k)$). Пусть число оставшихся точек равно m.

Разработан простой алгоритм решения задачи (1), когда оси эллипсоида совпадают с осями координат [7]. В этом случае, задача (1) эквивалентна следующей задаче:

$$\max\{\sum_{j=1}^{n}\log(a_j) \mid \sum_{j=1}^{n}a_j(x_j^i - x_j^0)^2 \leq 1, i = 1,...,m, a > 0\}. \quad (3)$$

Задача (3) преобразуется к двойственной

$$\max\{\sum_{j=1}^{n}\log(u_j(z) - v_j^2(z)) \mid e^T z = 1, z\geq 0\}, \quad (4)$$

где e – вектор, состоящий из единиц, а

$$u_j(z) = \sum_{i=1}^{m} z_i (x_j^i)^2,\ j = 1,...,m,$$

$$v_j(z) = \sum_{i=1}^{m} z_i x_j^i,\ j = 1,...,n.$$

Для решения задачи (4) используем метод Франка-Вулфа [8]. Пусть z^* – ее решение, тогда искомый эллипсоид имеет вид

$$E = \{x\sum_{j=1}^{n}\frac{(x_j - v_j(z^*))^2}{n(u_j(z^*) - v_j^2(z^*))} \leq 1\}.$$

Для построения эллипсоида, в общем случае, преобразуем систему координат, выбирая новые координатные гиперплоскости методом наименьших квадратов

$$\min\{\sum_{i=1}^{m}(a^T x^i - b)^2 \mid \|a\| = 1\},$$

где $a^T x = b$ – искомая гиперплоскость. Следующую координатную гиперплоскость найдем методом наименьших квадратов для проекции точек на пересечение предыдущих найденных координатных гиперплоскостей. Проекция точки x^i на пересечение гиперплоскостей $\{x \mid Ax = b\}$ вычисляется по следующей формуле:

$$x = x^i - A^T(AA^T)^{-1}(Ax^i - b).$$

После преобразования координат решаем задачу (4) и для найденного эллипсоида производим обратное преобразование координат.

Разработана программа, реализующая данный алгоритм. Пример работы программы представлен на рис. 1 для 7 точек

$$\{7,-3;1,6;-4,6;4,1;-2,5;1,2;-3,8\}.$$

Уравнение эллипсоида имеет вид

$$0,0103(x_1+0,641)^2+0,0367(x_2-0,997)^2+0,0064(x_1+0,641)(x_2-0,997)=1.$$

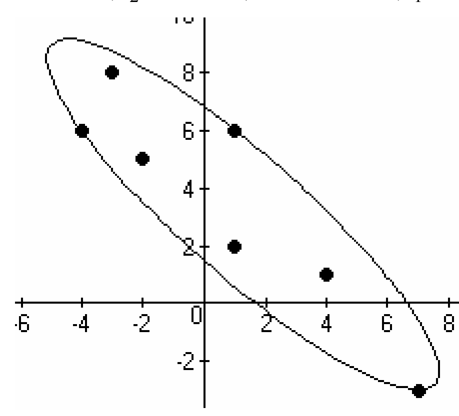


Рисунок 1 – Эллипсоид, содержащий точки

Задаче поиска минимального расстояния между двумя выпуклыми множествами S_1 и S_2 посвящено много работ [9], [10]. Она формулируется следующим образом. Найти

$$\min\{\|x-y\| \mid x\in S_1, y\in S_2\}.$$

Будем предполагать, что заданы два эллипсоида матрицами Q_1 и Q_2 с центрами в точках z^1, z^2 соответственно. Для поиска минимального расстояния между эллипсоидами $E_1(z^1)$ и $E_2(z^2)$ рассмотрим алгоритм, предложенный в [4].

1. Находим точки x^1, x^2 пересечения отрезка $[z^1, z^2]$ с границами эллипсоидов E_1, E_2.

2. Вычисляем градиенты g_1, g_2 в точках x^1, x^2 к эллипсоидам E_1, E_2. Задача поиска минимального расстояния решена, если

$$(x^2-x^1)^T\left(e-\frac{g_i^T e}{g_i^T g_i}g_i\right)=0, i=1,2,$$

тогда ее решение отрезок $[x^1, x^2]$ (e – вектор, состоящий из единиц).

Определяем центры новых шаров по формулам

$$z^i = x^i - \frac{g_i}{\|Q_i\|}, i=1,2$$

и переходим к шагу 1.

Из сходимости данного алгоритма [4] следует, что скалярные произведения

$$\frac{(g_i^k)^T g_i^*}{\|g_i^k\|\|g_i^*\|}, i=1,2$$

будут убывать, когда $k\to\infty$, где g_i^* – градиент в оптимальной точке. Это означает, что скорость сходимости алгоритма можно увеличить, если на втором шаге выбирать градиент в виде $g_i^k+\mu_k g_i^{k-1}$, где $\mu_k\to 0$.

В других алгоритмах на каждой итерации решается только задача (2). Она может быть решена методом Франка-Вулфа. Более простым является следующий алгоритм:

1. Находим градиент $g_2(x^1)$ и решаем задачу

$$\max\{g_2^T x \mid x \in E_2\}. \qquad (5)$$

Ее решение достигается в точке

$$x^* = z_2 + \frac{Q_2^{-1} g_2}{\sqrt{g_2^T Q_2^{-1} g_2}}.$$

2. Проектируем точку x^1 на гиперплоскость $g_2^T(x - x^*) = 0$, имеем

$$x = x^1 + \frac{g_2^T(x^* - x^1)}{\| g_2 \|} g_2.$$

Если точки x и x^* не совпадают, то полагаем $x^1 = (x + x^*)/2$ и переходим к шагу 1.

3. В противном случае, проектируем исходную точку на гиперплоскость $g_2^T(x - x^*) = 0$. Если проекция x^p совпадает с точкой x^*, то задача решена, иначе полагаем $x^1 = (1-\alpha)x^1 + \alpha x^p (0 \le \alpha \le 1, \alpha \to 0)$ и переходим к шагу 1.

На каждой итерации этого алгоритма расстояние между точкой x^1 и границей эллипсоида E_2 убывает. Одновременно убывает расстояние между точкой касания гиперплоскости эллипсоида и проекцией на эту гиперплоскость исходной точки. Поэтому в пределе будет найдено решение задачи (2).

Были проведены многочисленные эксперименты по сравнению эффективности этих алгоритмов. Они показали, что скорость сходимости второго алгоритма выше. В примере (рис. 2.)

$$E_1 = \{x \mid 1,2(x_1 - 2)^2 + 0,05(x - 3)^2 \le 1\},$$

$$E_2 = \{x \mid (x_1 + 3)^2 + 20x_2^2 + 4(x_1 + 3)x_2 \le 10\},$$

первый алгоритм потребовал более 300 итераций (нахождения шаров) для заданной точности $\varepsilon = 0,00001$, а второй алгоритм потребовал 7 решений задачи (2). Минимальный отрезок равен $[1,348937, -0,13478; 0,531722, -0,32035]$.

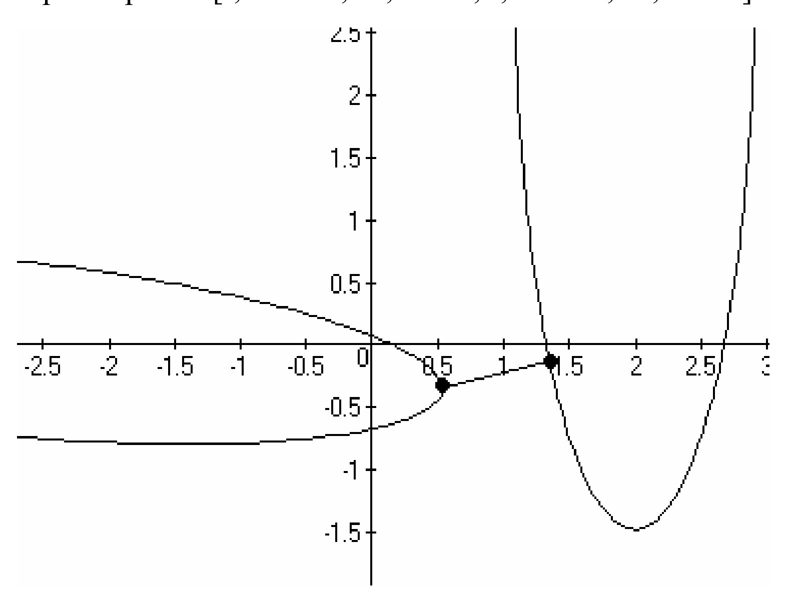


Рисунок 2 – Минимальный отрезок, соединяющий эллипсоиды

Рассмотрим задачу построения гиперплоскости, разделяющей два эллипсоида. Для ее решения используем алгоритмы предыдущей задачи. Если $[x^1, x^2]$ – кратчайший отрезок между двумя эллипсоидами, то разделяющей гиперплоскостью будет следующая

$$(x^2 - x^1)^T (x - \frac{x^2 - x^1}{2}) = 0.$$

Эта гиперплоскость перпендикулярна отрезку $[x^1, x^2]$ и проходит через его середину.

Выводы

Рассмотрены задачи компьютерной геометрии, которые относятся к квадратичной оптимизации. Предложены эффективные алгоритмы для решения этого класса задач. Их сходимость следует из сходимости используемых алгоритмов оптимизации. Разработано программное обеспечение, реализующее данные алгоритмы, и проведены численные эксперименты. Эти эксперименты подтверждают эффективность предложенных алгоритмов.

Литература

1. Препарата Ф. Вычислительная геометрия: Введение / Ф. Препарата, М. Шеймос; пер. с англ. С.А. Вичеса, М.М. Комарова; под. ред. Ю.М. Баяковского. – М. : Наука, 1989. – 480 с.
2. Todd M.J. Semidefinite optimization / M.J. Todd // Acta Numerica. – 2001. – № 10. – P. 515-560.
3. Goton J. Minimal ellipsoid circumscribing a polytope define by a system of linear inequalities / J. Goton, H. Konno. – University of Tsukuba, 2004. – 12 p.
4. Lin A. On the distance between two ellipsoids / A. Lin, S.-P. Han // SIAM Journal of Optimization. – 2002. – № 13. – P. 298-308.
5. Boyd S. Convex Optimization / S. Boyd, L. Vandenberghe. – Cambridge University Press. Cambridge. UK. – 2004. – 730 p.
6. Wang W. An algebraic condition for the separation of two ellipsoids / W. Wang, J. Wang, M.-S. Kim // Comp. Aided Geom. Design. – 2001. – № 18(6). – P. 531-539.
7. Kumar P. Computing Minimum-Volume Enclosing Axis-Aligned Ellipsoids / P. Kumar, E.A. Yildirim // J Optim Theory Appl. – 2008. – № 136. – P. 211-228.
8. Мину М. Математическое программирование / Мину М. – М. : Наука, 1990. – 488 с.
9. Cameron S. A comparison of two fast algorithms for computing the distance between convex polyhedral / S. Cameron // IEEE Trans. Robot. Automat. – 1997. – Vol. 13, № 6. – P. 915-920.
10. Jimenez P. 3D collision detection: A survey / Jimenez P., Thomas F., Torras C. // Computers and Graphics. – 2001. – № 25(2). – P. 269-285.

А.І. Косолап

Квадратичні оптимізаційні задачі комп'ютерної геометрії

Робота присвячена постановці та розв'язку класу квадратичних оптимізаційних задач комп'ютерної геометрії: пошук еліпсоїду мінімального об'єму, що містить множину точок евклідового простору, пошук мінімальної відстані між еліпсоїдами, побудова гіперплощини, що розділяє два еліпсоїда. Запропоновані ефективні алгоритми для розв'язку цього класу задач.

A.I. Kosolap

Quadratic Optimization Problems of Computer Geometry

The paper is devoted to the statement and the solution of a class of quadratic optimizing problems in the computer geometry: the search of the minimum volume ellipsoid that contains the set of points of Euclidean space, the search of the minimum distance between ellipsoids, the construction of the hyperplane separating two ellipsoids. The effective algorithms for the solution of this class of problems are offered.

Статья поступила в редакцию 01.12.2009.